

SCHEDA PROGETTO

<p>Responsabile del progetto: Prof.ssa Adriana Saccone: Professore ordinario di Chimica Generale ed Inorganica presso il DCCI.</p>
<p>Obiettivo del progetto: Con riferimento all'attività di ricerca sulla sintesi, caratterizzazione e proprietà di composti intermetallici svolta presso il gruppo di Chimica Inorganica del DCCI si rende necessaria l'analisi strutturale e l'esecuzione di calcoli quantomeccanici per l'analisi del legame chimico per composti ternari del germanio.</p>
<p>Oggetto della prestazione: Attività di supporto alla ricerca "Analisi strutturale e studio del legame chimico di germaniuri ternari".</p>
<p>Descrizione dettagliata della prestazione: L'attività relativa alla presente collaborazione dovrà essere così articolata:</p> <ul style="list-style-type: none"> ✓ Determinazione/affinamento della struttura cristallina dei composti intermetallici del germanio $R_4\{Li,Mg\}Ge_{10-x}$ (R = metallo delle terre rare) da dati di diffrazione di raggi X su cristallo singolo. ✓ Studio del legame chimico in composti $R-T-Ge$ (R = metallo delle terre rare; T = metallo di transizione), attraverso i seguenti step: <ul style="list-style-type: none"> - calcoli di densità degli stati (DOS), popolazione hamiltoniana degli orbitali cristallini (COHP), densità elettronica nell'ambito della teoria DFT, utilizzando i programmi LMTO-ASA, FPLO e FHI-aims dotati di implementazioni specifiche. - calcolo dei bacini atomici nell'ambito della teoria quantistica degli atomi nelle molecole (QTAIM). - calcolo della funzione ELI-D e sua analisi topologica. - valutazione della polarità dei legami tramite analisi dell'intersezione dei bacini ELI-D/QTAIM. - interpretazione dei risultati ottenuti e descrizione del legame chimico presente nei composti studiati.
<p>Competenze richieste al prestatore:</p> <ul style="list-style-type: none"> • Diploma di laurea magistrale o specialistica ovvero diploma di laurea del previgente ordinamento in Scienze Chimiche, Chimica, Chimica Industriale e Scienza e Ingegneria dei Materiali o affini. • Comprovata esperienza in laboratorio di chimica di almeno 2 anni. • Comprovata esperienza, anche di tipo pratico, nell'esecuzione ed interpretazione di calcoli quantomeccanici su composti intermetallici, con particolare riferimento alla loro applicazione per lo studio del legame nello spazio reale. • Conoscenza della lingua inglese.
<p>Durata del progetto: La prestazione dovrà concludersi entro il 31/03/2019.</p>
<p>Compenso Il compenso presunto lordo prestatore è di euro 2.750,00 eventualmente da modificare in base alla situazione fiscale e previdenziale del prestatore. Si ritiene tale compenso congruo in quanto ci si è basati su compensi corrisposti precedentemente per prestazioni analoghe.</p>
<p>Natura Fiscale della prestazione: (non si applica nel caso un dipendente dell'Ateneo risponda alla ricognizione interna)</p> <ul style="list-style-type: none"> • <i>Contratto che ha per oggetto una prestazione unica a esecuzione pressoché istantanea in quanto si (carattere episodico quali studi, consulenze etc) e nell'ambito dei quali il committente effettua il controllo del solo risultato che si propone di ottenere: lavoro autonomo – redditi diversi (art. 67, comma 1, lett. I, D.P.R. 917/86 TUIR);</i> <ul style="list-style-type: none"> ○ <i>lavoro autonomo - redditi di lavoro autonomo - professionisti abituali (art. 53, comma 1, D.P.R. 917/86 TUIR)</i>

Genova, 18/12/2018

IL RESPONSABILE DEL PROGETTO
Prof.ssa Adriana Saccone

Adriana Saccone